第 51 卷 第 9 期 2015 年 9 月 第1136-1144页
金属学报 ACTA METALLURGICA SINICA
Vol.51 No.9 Sep. 2015 pp.1136-1144

考虑位错相互作用的混合控制模型下先共析铁素体生长动力学模拟*

武慧东 张 弛 柳文波 杨志刚

(清华大学材料学院先进材料教育部重点实验室, 北京 100084)

摘 要 建立了考虑伴随台阶的位错间相互作用的界面反应-扩散混合控制模型, 并利用该模型对先共析铁素体2个台阶以及多个台阶的生长过程进行模拟. 结果表明, 当只有2个台阶且其水平距离大于临界距离时, 台阶之间相互吸引, 能在一定程度降低领先台阶的生长速率; 当2个台阶水平距离小于临界距离时, 台阶之间相互排斥, 增大领先台阶的生长速率; 多台阶的情形下, 伴随台阶的位错之间相互作用, 台阶的合并规律发生改变, 并对台阶生长速率产生一定影响.

关键词 先共析铁素体, 混合控制模型, 台阶生长动力学

中图法分类号 TG111.2, TG111.3 **文献标识码** A **文章编号** 0412-1961(2015)09-1136-09

SIMULATION OF GROWTH KINETICS OF PRO-EUTECTOID FERRITE USING MIXED CONTROL MODEL WITH CONSIDERATION OF DISLOCATION INTERACTION

WU Huidong, ZHANG Chi, LIU Wenbo, YANG Zhigang

Key Laboratory of Advanced Materials of Ministry of Education, School of Materials Science and Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084

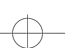
Correspondent: YANG Zhigang, professor, Tel: (010)62783203, E-mail: zgyang@tsinghua.edu.cn

Supported by National Natural Science Foundation of China (Nos.51171087 and 51471094)

Manuscript received 2015-02-01, in revised form 2015-04-07

ABSTRACT During austenite to ferrite transformation, the lattice structure transforms from fcc to bcc, resulting in a clearly distinguishable austenite and ferrite interface. The short range diffusion of the Fe and C atoms across the interface causes its movement, referred to as interface migration. On the other hand, the C rejected by the ferrite during the austenite to ferrite transformation in Fe-C alloys accumulates ahead of the moving interface. This pile-up of C atom is dependent on the long range diffusion of C in austenite and also influences the ferrite growth kinetics. Experimental observations indicate that dislocations are always migrating with ledges during ledgewise growth. The local stress field of dislocations is considered to alter the solute concentration at the riser of ledges and causes a complex diffusion field interaction among ledges as they migrate. Some established works by other researchers have already taken the effect into consideration when studying phase transformation kinetics. However, these works were limited in diffusion control cases and could hardly explain some experimental results. In this work, a ledgewise growth model considering migration of austenite/ferrite interface, C diffusion in austenite and especially elastic interactions between dislocations moving with ferrite ledges was established, and all the simulated results were qualitatively similar to the reported experimental results. Calculated results showed that the C concen-

*国家自然科学基金项目 51171087 和 51471094 资助
收到初稿日期: 2015-02-01, 收到修改稿日期: 2015-04-07
作者简介: 武慧东, 男, 1991 年生, 博士生
DOI: 10.11900/0412.1961.2015.00091



tration at the riser of ledges was changed by the elastic stress of these dislocations, which would further change the growth behavior of ledges. In the growth behavior simulations of two ledges, the horizontal distance of the two ledges was found to be a key role to determine the growth kinetics. When the horizontal distance of two ledges was larger than the critical distance, an attractive phenomenon of the two ledges was found to decelerate the leading step; while a repulsive phenomenon of the two ledges which would accelerate the leading ledge if the horizontal distance was smaller than this value. Compared with the simulation results without considering elastic interactions between dislocations, however, in the growth behavior simulations of multi-ledge with elastic dislocation interactions, the coalescence behavior of ledges and growth rate of the leading step were both changed.

KEY WORDS pro-eutectoid ferrite, mixed-control model, ledgewise growth kinetics

钢中先共析铁素体的生长的相变过程包含2个过程, 即溶质C原子由界面向母相奥氏体的长程扩散过程和界面处发生的母相奥氏体fcc结构向新相铁素体bcc结构的晶体结构转变过程. 因此, 先共析铁素体的生长模型有扩散控制模型和界面控制模型2种. 扩散控制模型, 即局部平衡模型[1~4]认为, 界面反应进行非常迅速, 先共析铁素体的生长由C原子在奥氏体中的扩散控制; 而界面控制模型则认为, 在相变过程中C原子的扩散非常迅速, 铁素体的生长过程取决于界面反应的快慢[5]. 扩散控制模型在转变温度较低、含C量较高时能较准确的描述铁素体的生长动力学, 而界面反应控制模型在母相奥氏体与新相铁素体C原子浓度接近时与实验结果吻合较好[6]. 基于以上2种模型, 研究人员[7,8]提出先共析铁素体的生长是由界面反应和C原子的扩散共同控制的, 即界面-扩散混合控制模型.

近年来, 研究人员[9~18]对铁素体的长大做了大量的计算工作. Enomoto[9,10]提出扩散控制的二维台阶生长模型, 并对铁素体的台阶生长过程做了研究. Hoyt[11]指出, 扩散控制台阶模型对Fe-C合金并不适用, 认为Fe-C合金中先共析铁素体的生长并不是完全由C扩散控制的. 本课题组在扩散控制台阶模型的基础上引入了界面反应的因素, 对先共析铁素体的台阶生长进行了初步研究[12~14]. 结果表明, 先共析铁素体的台阶生长速率是由界面处C原子的扩散过程和界面反应共同控制, 界面迁移率较大时, C原子由两相界面处向奥氏体中的扩散过程为影响台阶生长快慢的主要因素, 而界面迁移率较小时, 界面反应的速度决定台阶生长的快慢.

Hirth[15]研究发现, 台阶在生长过程中往往伴随着位错. 研究[15~17]表明, 伴随台阶的位错产生的应力场对铁素体台阶的长大产生一定的影响. 在台阶生长过程中, 伴随台阶的位错会对两相界面处的应力场有一定的影响, 进而对台阶的生长动力学产生影响. Kamat和Hirth[16]及Enomoto和Hirth[17]探讨了位错对于台阶生长的影响, 但并未考虑界面反应因素, 而且这方面的模拟仅对Al-Ag合金的相变过程进行了讨论[18]. 因此, 有必要对铁素体台阶长大过程中的台阶位错的相互作用展开系统的研究.

在本课题组前期混合控制台阶生长模型的基础上[12~14], 本工作在Fe-C合金的先共析铁素体长大过程引入伴随台阶的位错之间的相互作用, 探讨位错对于先共析铁素体台阶生长的影响, 并将计算结果与实验结果进行对比.

1 模型建立

1.1 台阶生长机制

在本课题组前期混合控制台阶生长模型的基础上[12~14], 假设铁素体在奥氏体晶界处形核, 向周围的奥氏体晶粒内部生长. 如图1所示, y轴沿晶界方向, 台阶在奥氏体晶界处形核后沿x轴奥氏体晶粒内生长. 由于台阶平台面为共格或半共格的结构, 铁素体在该方向的生长极缓慢可以忽略不计, 而台阶的侧面为无序结构, 可以进行稳定的迁移, 台阶侧面在该方向的移动速率即为铁素体的生长速率. 另外, 台阶侧面在向前移动过程中保持为平面状态, 即台阶侧面上各点的向前迁移速率相同.

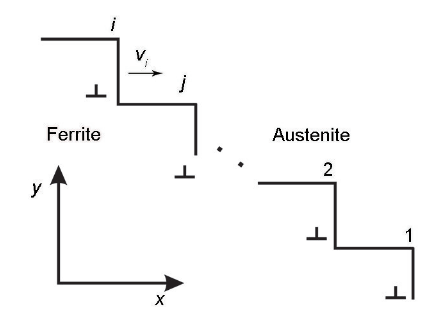


图1 每个台阶含1个位错的示意图

Fig.1 Schematic of each ledges with one dislocation (Burgers vector $\boldsymbol{b}$ is parallel to the terrace plane, v_i is the velocity of ledge i, "⊥" represents one edge dislocation)

假设每个台阶伴随1个刃位错, 位于前一个台阶平台面与该台阶侧面交界处, 位错跟随台阶一起运动[16,17]. 在台阶运动过程中, 其它台阶上的位错与台阶 i 上的位错相互作用(图1), 对台阶 i 侧面奥氏体侧C原子浓度产生影响, 进而对台阶 i 的生长速率产生影响.

1.2 考虑位错应力场的混合控制模型

C原子的扩散过程可以使用二维扩散方程进行描述:

$$\frac{\partial c}{\partial t}=D\left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 c}{\partial y^2}\right) \tag{1}$$

式中, c 是母相中的C原子的浓度, D 是C原子在奥氏体中的扩散系数, t 是时间. 在铁素体奥氏体两相界面处C原子的扩散通量 ΔJ 由2部分组成, 其中一部分是铁素体形成时向界面处释放的C原子扩散通量 $J_{\rm int}$, 另一部分是C原子向母相奥氏体中扩散的C原子扩散通量 $J_{{\rm int}+\Delta x}$, 如图2所示. 扩散通量 ΔJ 可用下式表示[8]:

$$\Delta J=J_{\rm int}-J_{{\rm int}+\Delta x}=\left\{\left(c_1^{\rm m}-c_\alpha\right)\cdot v_i+D\frac{\partial c_1^{\rm m}}{\partial x}\right\}_{\rm interface} \tag{2}$$

式中, $c_1^{\rm m}$ 和 c_α 分别为未考虑位错相互作用界面处奥氏体和铁素体侧的C原子浓度, v_i 为台阶 i 侧面的移动速率. 由于 $J_{{\rm int}+\Delta x}$ 和 $J_{\rm int}$ 并不完全相等, ΔJ 并不一定为0, 因而 $c_1^{\rm m}$ 在相变过程中不断发生变化. 铁素形核初期, 即相变刚开始阶段, $c_1^{\rm m}$ 为基体的C浓度 c^0, 随着反应的进行, $c_1^{\rm m}$ 逐渐增大.

在不考虑位错之间相互作用对台阶生长的影响时, 热力学驱动力被认为是驱使台阶侧面发生移动的原因, 该热力学驱动力由界面处奥氏体侧与基体之间的自由能差 $\Delta G_{\rm th}$ 所决定. 因此, 单位长度台阶所受的力 $F_{\rm th}$ 可以表示为[19]:

$$F_{\rm th}=\frac{\Delta G_{\rm th}}{V_{\rm m}}h \tag{3}$$

式中, $V_{\rm m}$ 是析出相铁素体的摩尔体积, h 是台阶高度. 若基体中C原子浓度足够小, 可以将 $\Delta G_{\rm th}$ 近似为:

$$\Delta G_{\rm th}=R\Theta\left\{\left(1-c^0\right)\ln\frac{1-c_1^{\rm m}}{1-c^0}+c^0\ln\frac{c_1^{\rm m}}{c^0}\right\} \tag{4}$$

式中, R 为理想气体常数, Θ 为相变温度.

考虑位错相互作用的影响, 图1中第 j 级台阶位错应力场对第 i 级台阶上位错的作用应力可以表示为[19]:

$$\sigma_{xy}^j=\frac{\mu b}{2\pi(1-\vartheta)}\frac{(x_i-x_j)\left\{\left(x_i-x_j\right)^2-\left(y_i-y_j\right)^2\right\}}{\left\{\left(x_i-x_j\right)^2+\left(y_i-y_j\right)^2\right\}^2}=\frac{\mu b}{2\pi\left(1-\vartheta\right)}\Phi(x_i,x_j,y_i,y_j) \tag{5}$$

式中, μ 和 ϑ 分别是基体的剪切模量和Poisson比. b 是在台阶台面上位错的Burgers矢量模, Φ 函数用于表示弹性应力的大小, (x_i, y_i) 和 (x_j, y_j) 分别为第 i 和 j 级台阶的横纵坐标. 多个连续台阶情形下, 作用于台阶 i 单位长度上的总弹性力 $F_{\rm x}$ 可以表示为:

$$F_{\rm x}=\sum_{j=s}^{n}\sigma_{xy}^j b \tag{6}$$

式中, s, n 分别起始台阶与最新形成台阶的编号. 考虑伴随台阶的位错见相互作用后, 驱使台阶侧面移动的等价热力学力 $F'_{\rm th}$ 可以表示为:

$$F'_{\rm th}=F_{\rm th}+F_{\rm x} \tag{7}$$

考虑位错相互作用影响后台阶奥氏体侧的C原子浓度变为 $c_2^{\rm m}$, 可以由如下方程来确定:

$$F'_{\rm th}=\frac{R\Theta}{V_{\rm m}}h\left\{\left(1-c^0\right)\ln\frac{1-c_2^{\rm m}}{1-c^0}+c^0\ln\frac{c_2^{\rm m}}{c^0}\right\} \tag{8}$$

为得到不考虑位错影响时的台阶前沿奥氏体侧的C原子浓度 $c_1^{\rm m}$, 此处仅需考虑一维扩散: 假设在台阶侧面不会有在 y 轴方向的扩散, 即铁素体奥氏体界面处仅考虑C原子从铁素体一侧向奥氏体一侧沿 x 轴方向的扩散, 结合式(2), 由Fick第二定律有:

$$\left.\frac{\partial c}{\partial t}\right|_{\rm int}=-\frac{\Delta J}{\Delta x}=-\frac{J_{\rm int}-J_{{\rm int}+\Delta x}}{\Delta x}=-\frac{\left(c_1^m-c_\alpha\right)\cdot v_i+D\left.\frac{\partial c_1^{\rm m}}{\partial x}\right|_{{\rm int}+\Delta x}}{\Delta x} \tag{9}$$

先共析铁素体的生长速率, 即台阶 i 侧面移动速率可以表示为:

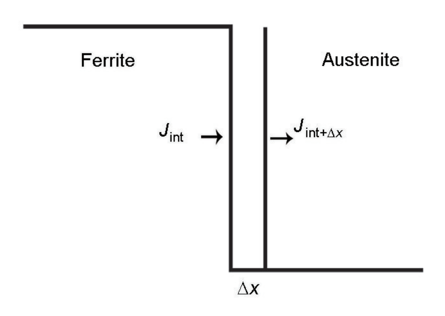
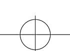


图2 奥氏体-铁素体界面扩散通量示意图

Fig.2 Schematic of C diffusion flux at austenite/ferrite interface ($J_{\rm int}$ and $J_{{\rm int}+\Delta x}$ are C fluxes flowing into and out of interface in volume element Δx, respectively)



$$v_i = M \cdot \Delta G_{\text{int}} \tag{10}$$

式中, M为广义界面迁移率, ΔG_{int} 为驱动界面迁移的自由能差. 式(10)中的 ΔG_{int} 与式(4)中的 ΔG_{th} 取值并不相同, ΔG_{th} 是热力学上近似的驱动界面的自由能差, 是为便于考虑位错之间相互作用所取的近似值; 而 ΔG_{int} 为总的相变驱动力作用于界面反应的部分, 为参考实验数据之后得到的数据. M可以表示为:

$$M = M_0 \exp\left(-\frac{E}{R\Theta}\right) \tag{11}$$

式中, 激活能E=140 kJ/mol[8]; M_0为常数, 因界面情况不同而取值不同, M_0的实验值为0.058~5000 mol·m/(J·s)[8,20]. 本工作取M_0=51.9 mol·m/(J·s). ΔG_{int} 可以使用下式进行计算[7]:

$$\Delta G_{\text{int}} = \chi \cdot \left(c^{\text{eq}} - c_2^{\text{m}}\right) \tag{12}$$

式中, 比例常数 χ =110 J/mol[7], c^{eq} 为相变温度下与新相先共析铁素体平衡时的奥氏体的C原子浓度.

根据Enomoto和Hirth[17]的研究, 位错相互作用对于台阶前沿奥氏体侧C浓度的影响可以从热力学角度来解释. 图3为考虑位错相互作用的影响时, 两相界面前沿奥氏体侧的C浓度变化引起的自由能变化的示意图. 图中, $c_2^{\text{m}'}$ 是位错对台阶的作用力 F_{x} 为负时得到的两相界面前沿奥氏体侧的C浓度. F_{x} 引起的自由能变化用 ΔG_{F} 表示. $\Delta G_{\text{th}} > 0$ 对应为相变能进行, F_{x} 为正. 对于台阶i, 考虑位错相互作用之后总的自由能变化 $\Delta G'_{\text{th}} = \Delta G_{\text{th}} + \Delta G_{\text{F}}$. 由图3a可以看到, 若 $|\Delta G_{\text{th}}| > |\Delta G_{\text{F}}|$, 则可以根据式(8)得到考虑位错作用之后的台阶前沿奥氏体侧的C浓度, $\Delta G_{\text{F}} > 0$, $c_2^{\text{m}} > c_1^{\text{m}}$, 而 $|\Delta G_{\text{th}}| < |\Delta G_{\text{F}}|$ 时, $c_2^{\text{m}'} < c_1^{\text{m}}$. 若 $\Delta G'_{\text{th}} < 0$, 此时界面前沿C浓度变化引起的自由能变化示意图可以由图3b来描述.

1.3 模拟方法

采用有限差分法对奥氏体晶界处先共析铁素体的台阶生长过程进行计算, 综合考虑C原子由界面处向奥氏体内部扩散[9,10]、界面反应[14]及伴随台阶位错的应力场多种因素的影响. 为了保证台阶在运动过程中形状不变, 在相变过程中, 同一个台阶侧面每一点向前运动的速度保持一致. 将坐标系固定在铁素体形核处(原奥氏体晶粒晶界), 在模拟过程中每一步均需考虑位错产生的应力场对台阶奥氏体侧C原子浓度的影响.

为了方便进行有限差分计算, 对c, t, v_i及x, y进行无量纲化处理, 定义无量纲浓度U, 无量纲时间T, 无量纲铁素体生长速率V和无量纲坐标X, Y为:

$$U = (c - c^0)/(c^{\text{eq}} - c^0) \tag{13}$$

$$T = Dt/h^2 \tag{14}$$

$$V = hv_i/D \tag{15}$$

$$X = x/h \tag{16}$$

$$Y = y/h \tag{17}$$

模拟的初始条件对应于: 特定温度下, C均匀分布在奥氏体组织中. 随着铁素体的析出, $T = k$时, 根据式(10)~(12)可以计算得到台阶侧面的该时刻的移动速率 V^k, 根据式(9)可以计算得到界面处奥氏体侧C原子浓度 U_{m1}^k, 根据式(3)~(8)得到考虑位错相互作用之后的台阶界面奥氏体侧C原子浓度 U_{m2}^k,

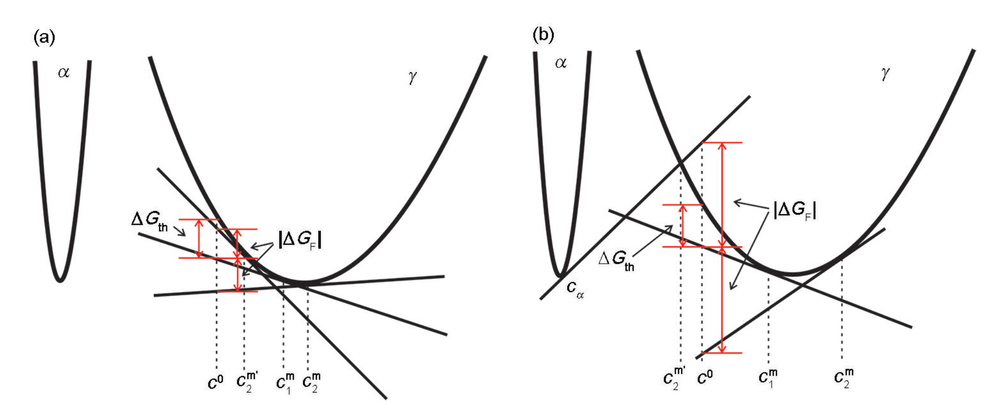


图3 计算得到 c_2^{m} 和 $c_2^{\text{m}'}$ 的图解

Fig.3 Graphical constructions for determination of c_2^{m} and $c_2^{\text{m}'}$ in cases of $\Delta G'_{\text{th}} > 0$ (a) and $\Delta G'_{\text{th}} < 0$ (b) (ΔG_{th}, ΔG_{F}, $\Delta G'_{\text{th}}$ are free energy changes attending to phase transformation, dislocation interaction and combination of the two, respectively. c^0 is bulk carbon concentration. c_1^{m}, c_2^{m}, $c_2^{\text{m}'}$ are carbon concentrations of austenite at the interface without considering dislocation interaction, when $\Delta G_{\text{F}} > 0$ and $\Delta G_{\text{F}} < 0$, respectively. c_α is equilibrium carbon concentration of ferrite)

根据式(1)可以得到整个区域每一个格点上的C原子浓度 U^k; 然后进行下一步计算, 即 $T=k+1$ 步骤, 重复 $T=k$ 步即可.

2 结果与讨论

为方便与本课题组前期结果[14]进行比较, 以Fe-0.34%C (原子分数)合金为例, 在720 ℃下发生等温 $\gamma\rightarrow\alpha$ 转变, 对先共析铁素体的生长动力学进行模拟. 使用Thermo-Calc的TCFE7数据库计算得到该温度下 c^{eq}=3.67%, c_α=0.092%, 使用Dictra的MOB2数据库得到该温度下C原子在奥氏体中的扩散系数 $D=4.398\times10^{-13}$ m²/s; 铁素体台阶高度 h=0.066 μm[21], 位错的Burgers矢量 $\boldsymbol{b}$ 沿铁素体密排方向, 且 $\boldsymbol{b}=1/2[111]$, 铁素体晶体常数 a=0.28664 nm[22], 基体的Poisson比和剪切模量分别为 $\vartheta=0.28$, μ=83 GPa[23]. 为简化起见, 本工作仅模拟铁素体的生长阶段, 暂不考虑形核阶段的影响, 认为形核阶段仅需极短的时间; 同时假设母相奥氏体晶粒远大于新相铁素体晶粒, 采用均匀形核方式形核, 即每间隔固定时间形成一个铁素体台阶.

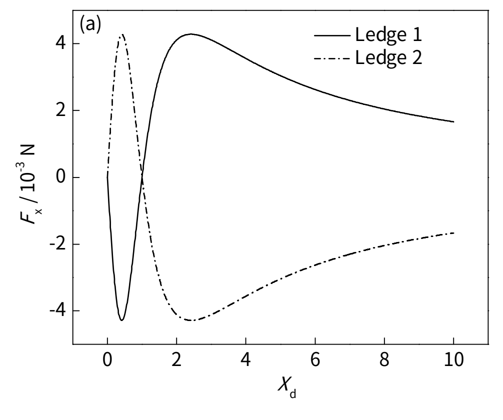
2.1 2个铁素体台阶的生长过程

为了研究位错应力场对台阶侧面奥氏体侧C原子浓度的影响, 仅考虑含有2个台阶的铁素体片层的长大过程.

图4a为根据式(6)绘制出来的 F_x 与 X_d 的关系, 其中, $X_d=X_1-X_2$, X_1, X_2, X_d 分别为无量纲处理之后的台阶1横坐标、台阶2横坐标和2个台阶的水平距离. 由于台阶高度恒定为 h, 仅需考虑水平距离 X_d 对 F_x 的影响. 在每个台阶包含一个位错的情形下, 位错之间相互作用对台阶1 (领先台阶)的作用力 F_x 先为负值, 即此时2个台阶相互吸引, 在 $X_d\approx1.0$ 时 F_x 发生转变, 称此距离为临界距离, 此后随着 X_d 增大, 2台阶相互排斥, 排斥作用在 $X_d\approx2.3$ 达到最大值, 之后排斥作用逐渐减弱, 最终 F_x 的数值趋向于稳定. 位错之间相互作用对于台阶2的作用力 F_x 的随 X_d 的变化则正好相反. 定义 $\Delta c^m=c_2^m-c_1^m$, 即位错相互作用引起的台阶1奥氏体侧C原子浓度变化. 图4b是 X_d 逐渐增加时, 台阶位错相互作用对于台阶1奥氏体侧C原子浓度的影响. 从图中可以看出, Δc^m 不仅与 X_d 有很大关系, 同时与 c_1^m 也有重要关系, 且 Δc^m 变化范围随着 c_1^m 的增加而逐渐减小, 在 $c_1^m=c^{eq}$ 时达到最小; X_d 对 Δc^m 的影响与其对 F_x 的影响趋势相同. 在2个台阶相互吸引时, 会使台阶1的 $\Delta c^m<0$, 而使台阶2的 $\Delta c^m>0$; 而在2个台阶相互排斥时, 会使台阶1的 $\Delta c^m>0$, 使台阶2的 $\Delta c^m<0$.

为了研究铁素体台阶生长的不同阶段下位错相互作用对台阶生长产生的不同的影响, 本节采用2种不同的总无量纲模拟时间: $T_1=6.25\times10^{-2}$ 和 $T_2=6.25\times10^{-1}$. 台阶2分别在 $T_1/2$ 和 $T_2/2$ 时刻形成并开始生长.

图5是考虑和不考虑位错相互作用情形下, 模拟时间为 $T_1=6.25\times10^{-2}$ 的铁素体的生长形貌. 为提高精度, 模拟过程中所使用横坐标 X 和纵坐标 Y 步长 ΔX, ΔY 均为1/4. 图5中标注坐标均为扩大了4倍之后的情形. 可以看到, 台阶位错之间的作用极大的限制了台阶2生长, 台阶2由于生长缓慢, 扩散充分, 导致台阶2周围C原子浓度梯度几乎为0 (图5a). 而对于台阶1, 在模拟时间段内, 考虑台阶位错



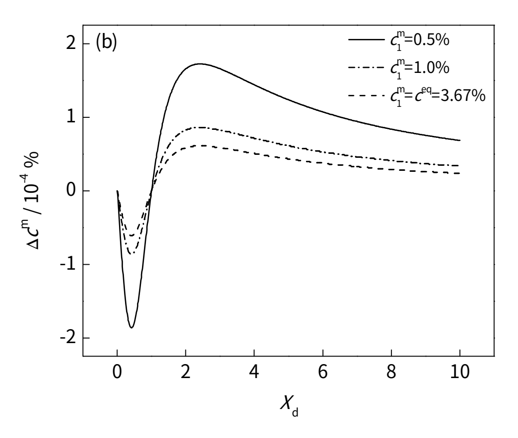


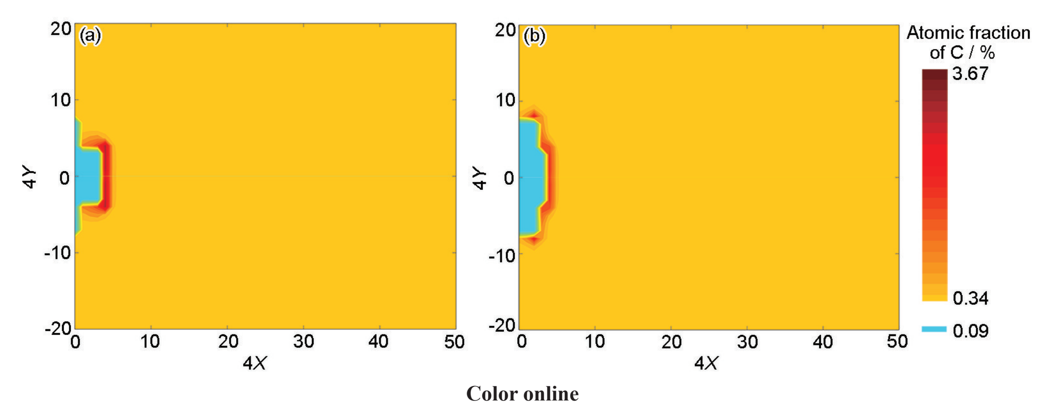
图4 作用于单位长度台阶上的力 F_x 及 F_x 引起的台阶1前沿C浓度变化 Δc^m 与2台阶水平距离 X_d 的关系

Fig.4 Influence of horizontal distance X_d between two ledges on elastic force acting on the unit length of ledge F_x (a) and carbon concentration change at the riser of ledge 1 Δc^m resulting from F_x (b) (c^{eq} —equilibrium carbon concentration of austenite)

相互作用时台阶1的长度更长, 但是差别并不显著, 另外该情形下台阶1周围C原子浓度梯度(图5a)较不考虑台阶位错相互作用时台阶1周围的C原子浓度梯度更大, 因而前者台阶1侧面向前移动速率更大, 即生长速率更大.

图6为考虑和不考虑位错相互作用的情形下, 两个台阶奥氏体侧C原子无量纲浓度U和台阶侧面无量纲移动速率V随时间的变化情况. 可以看出, 在没有位错相互作用的情形下, 台阶1的U= 0 (c^m=c^0), 随着台阶的生长, U迅速降增大, V迅速下降, 最后达到稳定值, 该过程需要较短的时间, 此后台阶1进入稳定生长阶段; 台阶2的出现对台阶1的生长速率并没有任何影响, 且台阶2的达到稳定生长状态的情形与台阶1类似(图6a). 另一方面, 在考虑台阶位错相互作用时, 台阶2的出现使得台阶1的U有一定的降低(图6b), 结合图5中2台阶的距离(X_d < 1), 即此时两台阶由于位错的相互作用而相互排斥, 因而会使台阶1的生长速率增大. 此时稳定生长的状态不再维持, 继续生长, 由于台阶1的生长速率大于台阶2的生长速率, 二者的距离不断变大, 位错的相互作用造成的2个台阶之间相互排斥作用逐渐减弱, 在位错相互作用、C原子的扩散以及界面反应的综合作用下, 台阶1的生长速率逐渐减小, 而台阶2的生长速率逐渐增大, 两台阶之间的速率差逐渐减小, 但这个过程进行的比较缓慢.

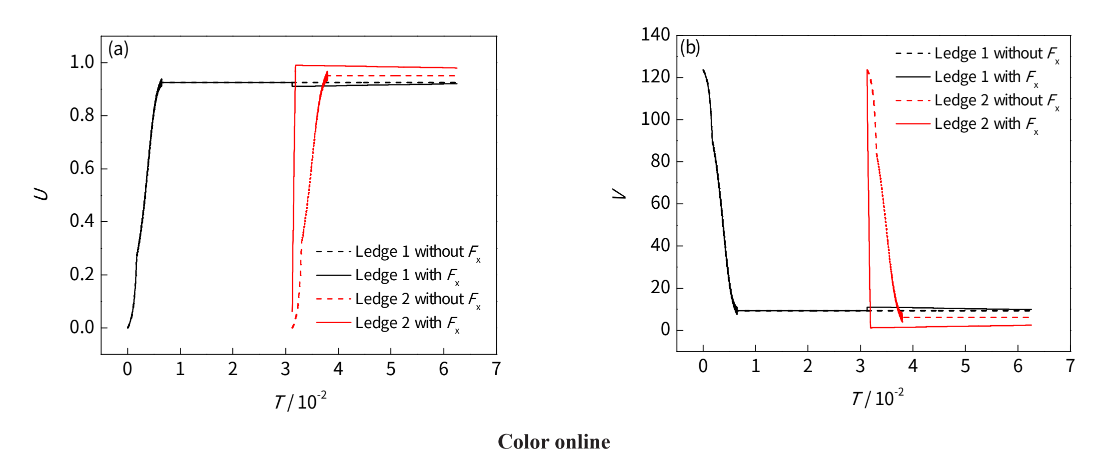
图7是考虑和不考虑位错相互作用两种情形下, 模拟时间为T_2= 6.25×10^{-1}的情形下铁素体的生长形貌. 可以看出, 在T_2时刻, 考虑台阶位错相互作



Color online

图5 Fe-0.34%C合金在720 ℃等温 γ→α 转变时间为T_1时考虑和不考虑台阶位错相互作用情况下2台阶铁素体形貌模拟结果

Fig.5 Simulation morphologies of two ledges pro-eutectoid ferrite during isothermal transformation of Fe-0.34%C alloy at 720 ℃ for normalized total isothermal transformation time T_1 with (a) and without (b) considering dislocation interaction (X and Y correspond to normalized horizontal and vertical ordinates, respectively and both ordinates are four times expanded)



Color online

图6 总相变时间为T_1, Fe-0.34%C合金在720 ℃等温 γ→α 转变时2台阶分别在考虑和不考虑台阶位错相互作用情况下U和V随T的变化

Fig.6 Normalized carbon concentration of austenite at the interface U (a) and ledge velocity V (b) evolutions with normalized transformation time T during isothermal transformation of Fe-0.34%C alloy at 720 ℃ with and without considering dislocation interaction with total transformation time T_1

用的情形下的台阶1的长度较短, 其界面前沿的扩散场分布范围较大(图7a), 这是由于此时 V 较小, 有较充足的时间发生C原子的扩散造成, 台阶2的情形则相反(图7b).

图8为考虑和不考虑位错相互作用的情形下, 2个台阶的 U 和 V 随时间的变化情况. 可以看出, 不考虑台阶位错相互作用的情形与模拟时间为 T_1 的情形类似. 而在考虑台阶位错相互作用的情形下, 台阶2刚形成时, 两台阶的距离较大, 超过临界距离, 此时台阶1和2表现为相互吸引, 使台阶1的 V 减小(图8b), 而台阶2在位错相互作用的影响下, 并没有迅速在界面前沿积累大量C原子(图8a), 因而 ΔG_{int} 较大, 其可以保持较高速生长一定时间. 随着 X_d 逐渐减小, 当其小于临界距离时, 两台阶变得互相排斥, 使得台阶1的速率大于台阶2的速率, 继续生长, X_d 增大直至大于临界距离, 这个往复的过程可以看做"缓冲过程"(图8b); 该过程是位错的相互作用, C原子的长程扩散及界面反应多种因素综合作用的结果. 此后由于2台阶前沿 U 均接近于达到热力学平衡时奥氏体的C原子含量(无量纲值为1), 因而位错相互作用造成的影响也大大减弱, 台阶1与台阶2生长速率 V 的变化也逐渐变缓, 二者的速率差逐渐减小.

2.2 多个铁素体台阶的生长过程

根据文献[18]对于台阶生长模拟结果的归纳, 在有多个台阶的情形下, 随着台阶初始间距的减小, 台阶之间更容易合并从而形成大台阶. 而在台阶初始间距较大的情形下, 往往领先台阶具有较大的生长速率, 因而台阶不容易发生合并现象. 为了方便考察位错相互作用对于台阶合并情况的影响,

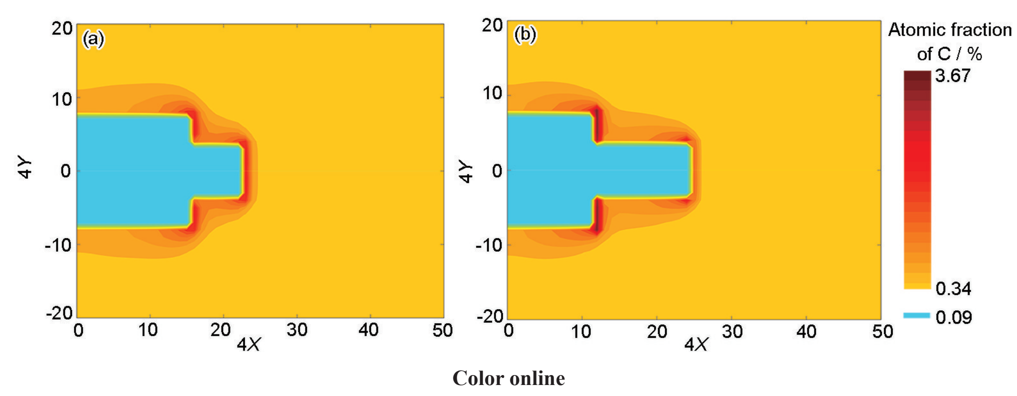


图7 Fe-0.34%C合金在720 ℃等温 $\gamma \rightarrow \alpha$ 转变时间为 T_2 时考虑和不考虑台阶位错相互作用情况下2台阶铁素体形貌模拟结果

Fig.7 Simulation morphologies of two ledges pro-eutectoid ferrite during isothermal transformation of Fe-0.34%C alloy at 720 ℃ for normalized total isothermal transformation time T_2 with (a) and without (b) considering dislocation interaction

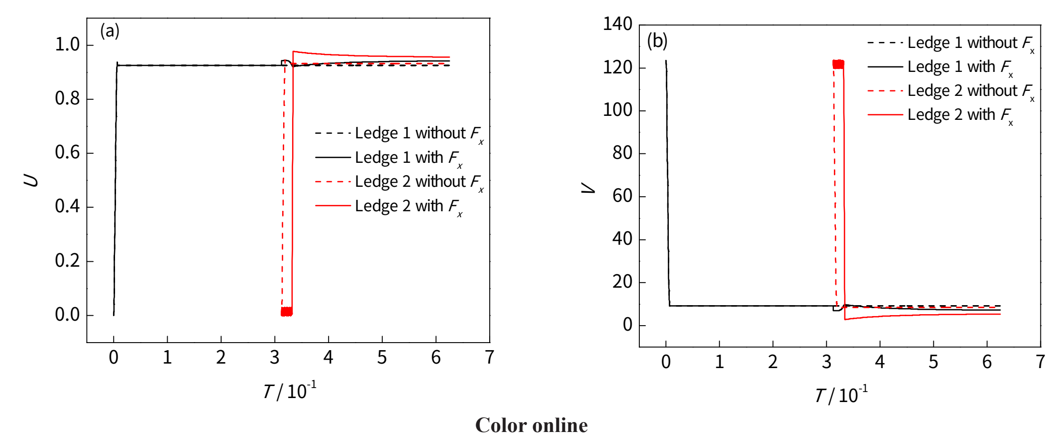


图8 总相变时间为 T_2, Fe-0.34%C合金在720 ℃等温 $\gamma \rightarrow \alpha$ 转变时2台阶分别在考虑和不考虑台阶位错相互作用情况下 U 和 V 随 T 的变化

Fig.8 U (a) and V (b) evolutions with T during isothermal transformation of Fe-0.34%C alloy at 720 ℃ with and without considering dislocation interaction with total transformation time T_2

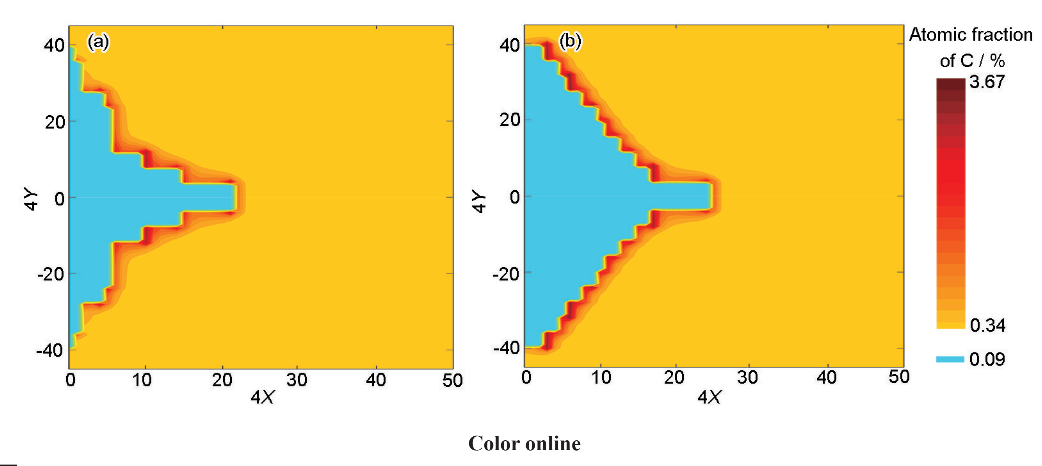
选用较大的M_0=51.9 mol•m/(J•s)以及较大的台阶形核间隔时间, 来实现较大的台阶之间初始间距. 此处模拟采用总的台阶数目为10, 模拟总时间仍为T_2=6.25×10^{-1}, 每隔T_2/10形成一个台阶, 在T_2时刻的铁素体形貌如图9所示. 图9b为不考虑台阶之间位错相互作用的生长形貌, 10个台阶并没有发生合并, 而考虑台阶位错相互作用的影响后(图9a), 台阶出现了合并, 其形貌也发生了变化.

在没有位错的情形下, 台阶在达到稳定生长阶段之后, 生长速率便不再变化, 且由于领先台阶的速度较大, 因而没有发生台阶合并的现象, 达到稳定生长状态之后各个台阶之间便不再相互影响(图9b). 而考虑位错相互作用的情形下, 伴随台阶2, 3, …, 10的位错对台阶1的生长均产生影响, 综合作用的结果是使台阶1在T时间段内生长的长度较不考虑位错相互作用的情形要短. 另一方面, 在前后台阶位错的相互作用下, 部分台阶发生了合并, 如台阶4, 5, 6合并为一个台阶, 台阶8, 9合并为一个台阶, 台阶合并后作为一个大台阶整体向前生长(图9a).

在不考虑台阶位错相互作用的情形下, 完全由扩散控制的台阶模型及界面-扩散控制台阶模型得到的台阶生长结果为在较短的时间内台阶生长速率达到稳定, 此后领先台阶生长速率并不发生改变. 即使领先台阶与其他台阶合并, 合并后的台阶仍以领先台阶的速率生长.

2.3 铁素体台阶非线性生长的一种解释

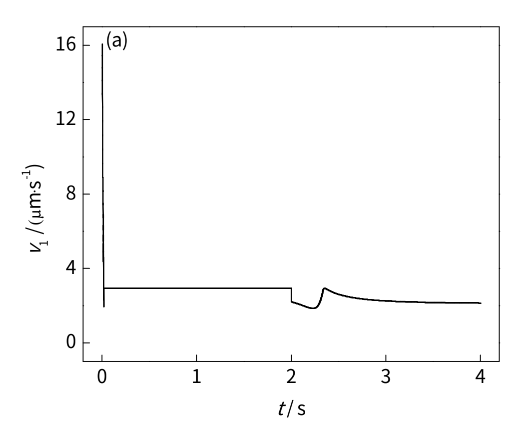
Eichen等[24]将Fe-0.305%C合金在740 ℃等温转变不同时间, 使用热电子发射显微镜对先共析铁素体的生长曲线进行了测量. 实验结果表明, 台阶1的长度并不是呈现线性增长, 而是呈现一定的不规则. 例如近似线性生长一段时间之后, 其生长速率出现较为明显的波动, 此后又逐渐近似于线性生长(图10b). 根据



Color online

图9 Fe-0.34%C合金在720 ℃等温 $\gamma\rightarrow\alpha$ 转变时间为T_2时考虑和不考虑台阶位错相互作用情况下10台阶铁素体形貌模拟结果

Fig.9 Simulation morphologies of 10 ledges pro-eutectoid ferrite during isothermal transformation of Fe-0.34%C alloy at 720 ℃ for normalized total isothermal transformation time T_2 with (a) and without (b) considering dislocation interaction



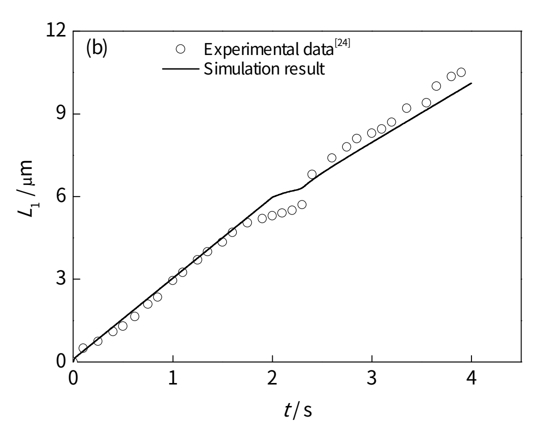


图10 Fe-0.305%C合金在740 ℃等温 $\gamma\rightarrow\alpha$ 转变时台阶1的生长速率v_1和长度L_1随时间t变化

Fig.10 Evolutions of growth velocity v_1 (a) and length L_1 (b) of ledge 1 with transformation time t

本工作在该条件下模拟结果(M_0=0.27 mol·m/(J·s)), 这种生长规律可能是由于有新的台阶的出现, 伴随台阶的位错之间的相互作用对台阶的生长过程产生影响. 在领先台阶生长线性生长出现变化的时刻引入第二个台阶, 此时由于两台阶的距离较大, 两台阶表现为互相吸引, 台阶1的生长速率v_1减小, 经历"缓冲过程", 即v_1减小到最低点然后逐渐增加, 再减小, 随后趋于稳定的过程(图10a). 台阶1的长度L_1随铁素体生长时间t的线性增长随着第二个台阶的出现而被打破, 此后经过一段时间又恢复近似线性生长(图10b), 模拟结果能够较好的描述实验结果所揭示的规律, 表明考虑伴随台阶的位错之间的相互作用的混合控制模型能够对这种现象进行恰当的描述. 随着台阶数目的增长, 位错之间的相互作用也变得更加复杂, 此时先共析铁素体台阶长度随时间增长的曲线会更加偏离线性增长的规律. Kinsman 等[21]和 Simonen 等[25]对于先共析铁素体台阶生长速率测量的实验结果中亦有类似的现象.

3 结论

(1) 在混合控制台阶生长模型的基础上, 考虑伴随台阶的位错之间的相互作用, 建立了用于模拟先共析铁素体长大的模型.

(2) 在只有2个铁素体台阶生长的情形下, 位错的相互作用与台阶之间的水平间距有关. 在台阶间水平间距小于临界距离时两台阶表现为排斥作用, 此时会对领先台阶(台阶1)的生长速率有增大的作用, 使跟随台阶(台阶2)的生长速率减小, 与不考虑位错相互作用的情形中台阶一旦达到稳定的生长速率就不再变化的情形并不相同. 若台阶间水平间距大于临界距离, 则两台阶之间相互作用为相互吸引, 与上述情况完全相反. 在多个台阶生长的情形中, 位错的相互作用会使台阶生长行为发生改变, 对台阶的生长动力学产生一定影响.

(3) 考虑伴随台阶的位错的相互作用的混合控制台阶模型能够合理的解释先共析铁素体领先台阶并不完全按照线性规律生长的实验现象.

参考文献

[1] Zener C. *J Appl Phys*, 1948; 20: 950
[2] Kirkaldy J S. *Can J Phys*, 1957; 35: 435
[3] Kirkaldy J S. *Can J Phys*, 1957; 36: 907
[4] Coates D E. *Metall Trans*, 1972; 3: 1203
[5] Christian J W. *The Theory of Transformations in Metals and Alloys*. 3rd Ed., Oxford: Pergamon Press, 1975: 480
[6] Xu Z Y. *Principle of Phase Change*. Beijing: Science Press, 1988: 1 (徐祖耀. 相变原理. 北京: 科学出版社, 1988: 1)
[7] Sietsma J, Van der Zwaag S. *Acta Mater*, 2004; 52: 4143
[8] Krielaart G P, Sietsma J, Van der Zwaag S. *Mater Sci Eng*, 1997; A237: 216
[9] Enomoto M. *Acta Metall*, 1987; 35: 935
[10] Enomoto M. *Acta Metall*, 1987; 35: 947
[11] Hoyt J J. *Acta Mater*, 2013; 61: 4953
[12] Yang Z Z, Li Z D, Liu Z Y, Liu Z Q, Xia Z X, Zhang C. *Solid State Phenomena*, 2011; 172: 1134
[13] Liu Z Q, Yang Z Z, Li Z D, Zhang C. *Int J Miner Metall Mater*, 2012; 19: 428
[14] Liu Z Y, Yang Z Z, Li Z D, Liu Z Q, Zhang C. *Acta Metall Sin*, 2010; 46: 390 (刘志远, 杨志刚, 李昭东, 刘振清, 张 弛. 金属学报, 2010; 46: 390)
[15] Hirth J P. *Metall Trans*, 1991; 22A: 1331
[16] Kamat S V, Hirth J P. *Acta Metall*, 1994; 42: 3767
[17] Enomoto M, Hirth J P. *Metall Mater Trans*, 1996; 27A: 1491
[18] Pereloma E, Edmonds D V. *Phase Transformations in Steels*. Cambridge: Woodhead Publishing Ltd, 2012: 176
[19] Hirth J P, Lothe J. *Theory of Dislocations*. 2nd Ed., Melbourne: Krieger, 1992: 117
[20] Hillert M. *Metall Mater Trans*, 1975; 6A: 5
[21] Kinsman K R, Eichen E, Aaronson H I. *Metall Trans*, 1975; 6A: 303
[22] Andrews K W. *Acta Metall*, 1963; 11: 939
[23] Köster W, Franz H. *Metall Rev*, 1961; 6: 1
[24] Eichen E, Aaronson H I, Pound G M, Trivedi R. *Acta Metall*, 1964; 12: 1298
[25] Simonen E P, Aaronson H I, Trivedi R. *Metall Trans*, 1973; 4: 1239

(责任编辑:罗艳芬)

